

This Page Is Inserted by IFW Operations
and is not a part of the Official Record

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images may include (but are not limited to):

- BLACK BORDERS
- TEXT CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- FADED TEXT
- ILLEGIBLE TEXT
- SKEWED/SLANTED IMAGES
- COLORED PHOTOS
- BLACK OR VERY BLACK AND WHITE DARK PHOTOS
- GRAY SCALE DOCUMENTS

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

As rescanning documents *will not* correct images,
please do not report the images to the
Image Problem Mailbox.

THIS PAGE BLANK (USPTO)

PCT/JP97/03924

29.10.97

日本国特許庁

PATENT OFFICE
JAPANESE GOVERNMENT

REC'D 06 FEB 1998

WIPO PCT

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されて
いる事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed
with this Office.

出願年月日
Date of Application:

1996年11月11日

出願番号
Application Number:

平成 8年特許願第299059号

出願人
Applicant(s):

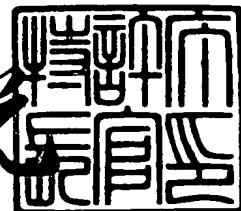
住友化学工業株式会社

PRIORITY DOCUMENT

1998年 1月23日

特許庁長官
Commissioner,
Patent Office

荒井寿之



出証番号 出証特平09-3100176

【書類名】 特許願
【整理番号】 147548
【提出日】 平成 8年11月11日
【あて先】 特許庁長官 荒井 寿光 殿
【国際特許分類】 G01N 9/00
【発明の名称】 有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いた安全性評価方法
【請求項の数】 3
【発明者】
【住所又は居所】 兵庫県宝塚市高司4丁目2番1号 住友化学工業株式会社内
【氏名】 的場 好英
【発明者】
【住所又は居所】 大阪府大阪市此花区春日出中3丁目1番98号 住友化学工業株式会社内
【氏名】 松尾 昌▲とし▼
【特許出願人】
【識別番号】 000002093
【氏名又は名称】 住友化学工業株式会社
【代表者】 香西 昭夫
【代理人】
【識別番号】 100080034
【弁理士】
【氏名又は名称】 原 謙三
【電話番号】 06-351-4384
【手数料の表示】
【予納台帳番号】 003229
【納付金額】 21,000円

【提出物件の目録】

【物件名】 明細書 1

【物件名】 図面 1

【物件名】 要約書 1

【包括委任状番号】 9006416

【ブルーフの要否】 要

【書類名】 明細書

【発明の名称】 有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いた安全性評価方法

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

有害生物防除活性化合物を含む溶液を纖維の穂立ちを有する敷物が置かれた床全域に噴霧するときに、上記纖維の穂立ち間の空間部分、大・小の2種の浮遊粒子、室内空気、纖維全体、壁、及び天井における上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立し、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、連立微分方程式の解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測することを特徴とする有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法。

【請求項 2】

有害生物防除活性化合物を含む溶液を纖維の穂立ちを有する敷物が置かれた床全域に噴霧するときに、上記纖維の穂立ち間の空間部分、大・小の2種の浮遊粒子、室内空気、纖維全体、壁、及び天井における上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立し、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、連立微分方程式の解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測し、その後、上記予測結果に基づいて上記溶液を床全域に噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価することを特徴とする有害生物防除活性化合物の安全性評価方法。

【請求項 3】

有害生物防除活性化合物を含む溶液を纖維の穂立ちを有する敷物が置かれた床全域に噴霧するときに、上記纖維の穂立ち間の空間部分、大・小の2種の浮遊粒子、室内空気、纖維全体、壁、及び天井における上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立し、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら

可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、連立微分方程式の解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測するコンピュータプログラムを記録した記録媒体。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は、有害生物防除活性化合物が含まれる薬剤を床全面に噴霧した際の化合物の室内挙動を予測する有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法、及びそれを用いて人体に対する安全性を評価する安全性評価方法に関するものである。

【0002】

【従来の技術】

従来から、ノミやダニ等のカーペット内の害虫を駆除するための殺虫剤が販売されている。この殺虫剤をカーペット全面に噴霧した際に、殺虫剤に含まれる有害生物防除活性化合物が室内でどのような振る舞いを示すかが従来より研究されている。

【0003】

このような研究の1つとして、Y.Matoba et al. "INDOOR SIMULATION OF INSECTICIDES IN BROADCAST SPRAYING" Chemosphere, Vol.30, No.2, pp345-365, 1995に、地球環境における化学物質の振る舞いをシミュレートするFugacityモデルを応用したシミュレーションモデルが記載されている。

【0004】

上記Fugacityモデルは、化学物質がある媒体から他の媒体へ逃げようとする外力、即ち圧力を単位に持つFugacityを用いるものである。例えば化学物質濃度が2つの媒体A, Bで異なっているときに、各媒体における濃度は、

$$N_A / V_A = f_A Z_A$$

$$N_B / V_B = f_B Z_B$$

で表される。ここで、Nは化学的質量、Vは媒体の体積、fはFugacity、及びZは媒体のFugacity capacity である。

【0005】

このとき、媒体A, B間の化学物質の移動(Transference)及び分解 (Degradation)によって質量Nは時間と共に変化する一方、体積V及びFugacity capacity Zを一定と仮定したとき、上記2式は、

$$\begin{aligned} (\text{d} f_A / \text{d} t) V_A Z_A &= \text{d} N_A / \text{d} t \\ &= - (\text{Degradation})_A \pm (\text{Transference})_{AB} \\ (\text{d} f_B / \text{d} t) V_B Z_B &= \text{d} N_B / \text{d} t \\ &= - (\text{Degradation})_B \pm (\text{Transference})_{AB} \end{aligned}$$

と表される。

【0006】

この2つの微分方程式におけるDegradation とTransferenceとが与えられれば、未知のパラメータである f_A , f_B を計算で求めることができ、これらにFugacity capacity Z_A , Z_B を各々掛けることによって、各媒体における特定期間の化学物質濃度をシミュレートすることが可能となる。

【0007】

上記論文におけるシミュレーションモデルは、このようなFugacityモデルを用いて、カーペット纖維間の空間部分、大・小の浮遊粒子、室内空気全体、カーペット纖維全体、壁、及び天井における化合物のFugacityに関する微分方程式を立て、これら7種の微分方程式を連立して解くことによって、殺虫剤をカーペット全面に噴霧したときに殺虫剤に含まれる上記化合物の挙動を予測するものである。このモデルを用いたシミュレーション結果では、化合物の挙動は実際の測定による挙動とほとんど一致していることが確認されている。

【0008】

【発明が解決しようとする課題】

しかしながら、上記シミュレーションモデルでは、微分方程式をどのように解くかは言及されておらず、微分方程式を解くときに設定される微小時間単位は一定値であると考えられる。理論的には、微小時間単位が小さければ計算時間が増大し、大きければ解が収束しなくなる。従って、経時的変化を伴うパラメータを含む微分方程式を解く場合に、解が発散しないように微小時間単位を一定値とす

ると、コンピュータの処理速度が増大するという問題を有している。

【0009】

また、上記シミュレーションモデルでは、人体に対する安全性についての言及も何らなされていない。

【0010】

本発明は、上記従来の問題点を解決するためになされたもので、その目的は、微小時間単位を自動的に設定することによって、連立微分方程式を短時間かつ正確に処理することが可能な有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いた安全性評価方法を提供することにある。

【0011】

【課題を解決するための手段】

上記の目的を達成するために、本発明の請求項1に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、有害生物防除活性化合物を含む溶液を纖維の穂立ちを有する敷物が置かれた床全域に噴霧するときに、上記纖維の穂立ち間の空間部分、大・小の2種の浮遊粒子、室内空気、纖維全体、壁、及び天井における上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立し、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、連立微分方程式の解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測することを特徴としている。

【0012】

上記の方法によれば、環境を7つの媒体と見なし、各媒体における化合物の圧力に関する微分方程式を連立して解くことによって、有害生物防除活性化合物の室内での振る舞いを予測することができる。

【0013】

ここで、上記連立微分方程式を解くときに、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように噴霧後の室内での化合物のマスバランスが常にチェックされて微小時間単位が可変するので、マスバランスの変動が小さい場合には上記微小時間単位が大きく設定され、マスバランスの変動が大きくなり始めると微小

時間単位が小さく設定されることとなる。つまり、経時的変化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に微小時間単位が設定される。

【0014】

これにより、微小時間単位が一定値であった従来の方法と比べて、コンピュータで上記微分方程式を処理する場合に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

【0015】

請求項2に記載の有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、請求項1に記載の室内挙動予測方法による予測結果に基づいて、上記溶液を床全域に噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価することを特徴としている。

【0016】

上記の方法によれば、請求項1に記載の方法で得られた予測結果を用いているので、短時間、かつ精度良く、有害生物防除活性化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となる。これにより、有害生物防除活性化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

【0017】

尚、請求項3に記載したように、有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法をコンピュータプログラムとして実現することもできる。

【0018】

【発明の実施の形態】

本発明の実施の一形態について図1ないし図7に基づいて説明すれば、以下の通りである。

【0019】

本実施形態にかかる殺虫剤等の薬剤（溶液）に含まれる有害生物防除活性化合物（以下、単に化合物と称する）の室内挙動予測方法は、床全面にポリマー繊維からなるカーペット（敷物）が敷かれている場合に適用されるものである。また、上記薬剤は、ピレスロイド系殺虫性化合物、有機リン系化合物、カーバメート

系化合物、及び昆虫成長抑制剤（I G R）等の殺虫剤等を用いることができ、溶媒としては水やオイルのものがあるが、本実施形態では溶媒が水のものについて説明する。また、殺虫の対象となる害虫は主にノミやダニ等である。

【0020】

まず、カーペットを図2に示すようにモデル化する。つまり、カーペットを、基材の上に植設された複数のカーペット纖維（纖維の穂立ち）とそれらの纖維間に存在する空間部分とに分ける。このようなカーペットが敷かれた床全域に薬剤を噴霧すると、薬剤の溶媒が水であるので、上記カーペット纖維には薬剤がしみ込むと共に、空間部分には薬剤が溜まることになる。また、床に付着する以外に、浮遊粒子として空気中に浮遊するものもある。

【0021】

従って、カーペットが敷かれた室内環境を、図3に示すように、カーペットの空間部分、直径が異なる大・小の2種の浮遊粒子、室内空気全体、床（カーペット纖維）、壁、及び天井の7種の媒体に分類する。

【0022】

浮遊粒子を2種に分けるのは、粒子の振る舞いが主にその直径に依存しているためであり、噴霧直後は各粒子は同一箇所に分布するが、時間が経てば、大粒子はその重さのため床に近い粒子領域 DZ_2 、そして小粒子は大粒子に比べて軽いため天井に近い粒子領域 DZ_3 にそれぞれ分布することになるからである。

【0023】

上記7種の媒体における化合物のFugacityに関する連立微分方程式を立て、これをルンゲクッタジル法を用いて解くことによって、薬剤をカーペット全面に噴霧した際の薬剤中の化合物の室内挙動、即ち室内における化合物分布、床・壁・天井等の内装材への付着量の経時的変化を予測解析する。

【0024】

図1に基づいて、上記化合物の室内挙動予測方法を説明する。

まず、ステップ（以下、Sと略称する）1で1次条件を入力する。この1次条件は、化合物の物理化学的性質（表1参照）、化合物の室内環境挙動性質（表2参照）、室内環境（表3参照）、カーペット条件（表4参照）、及び製品の性質

(表5参照) である。

【0025】

【表1】

化合物の物理化学的性質	記号	数値例
分子量	M	350.62 [g/mole]
比重	ρ	1 [g/cm ³]
蒸気圧	P^s	6.7×10^{-3} [Pa]
水溶解度	C^s	1.1×10^{-3} [mole/m ³]
オクタノール／水分配係数	K_{ow}	$10^{5.1}$

【0026】

【表2】

化合物の室内環境挙動性質	記号	数値例
光・酸化半減期 in カーペットの空間部分	τ_1	
浮遊粒子	τ_i (i=2, 3)	1.89×10^5 [sec]
空気	τ_4	
床・壁・天井	τ_j (j=5, 6, 7)	
床・壁・天井中の拡散係数	D_p	4.52×10^{-15} [m ² /s]

【0027】

【表3】

室内環境	記号	数値例
部屋の大きさ	V_4	23.3 [m ³]
温度	T	298 [K]
相対湿度	ϕ	60 [%RH]
絶対湿度	H	1.19×10^{-2} [kg H ₂ O/kg/dry air]
換気率	G	0.58 [1/h]
粒子構成溶媒の室内蒸気圧	P_∞	1.89×10^3 [Pa]
空気拡散係数	D_{air}	8.64×10^{-2} [m ² /h]

但し、 $V_4 = L_4 \times W_4 \times H_4$ (=3.6m×2.7m×2.4m) である。

【0028】

【表4】

カーペット条件	記号	数値例 [m ² /m ² 床]
カーペットの空間部分の断面積	A_1	1.6×10^{-3}
カーペット 繊維が空間部分の化合物と接触する面積	A_{15}	0.192
カーペット 繊維が化合物と接触する面積	A_{a5}	1.19

【0029】

【表5】

製品の性質	記号	数値例
化合物含有量	C_a	0.5 [%]
噴霧割合	—	25.4 [ml/m^2]
薬剤床付着率	—	60 [%]
製品中に含まれる溶剤 (Xylene) の含有率	C_{sol}	—
製品の希釈倍率	X_{sol}	—
浮遊粒子の直径 大粒子	d_{02}	10 [μm]
小粒子	d_{03}	1 [μm]
浮遊粒子の分布 大粒子	—	約 40 [%]
小粒子	—	約 0.006 [%]
浮遊粒子の空間幅 大粒子	$H_{(2)}$	2 [m]
小粒子	$H_{(3)}$	1 [m]

【0030】

尚、表3における数値例は、典型的な日本のアパートの6畳間を想定したものである。

【0031】

また、表4のカーペットの空間部分の断面積 (A_1) は、空間部分が室内空気と接触する面積のことである(図2参照)。さらに、表4における数値例は、図2に示す数値に基づいたものである。ここでは、1つの空間部分を $0.1 [\text{mm}] \times 0.1 [\text{mm}] \times 3 [\text{mm}]$ 、1角のカーペット繊維を $2.5 [\text{mm}] \times 2.5 [\text{mm}] \times 3 [\text{mm}]$ の大きさとしている。また、 $1 [\text{cm}^2]$ 中に16 [個] のカーペット繊維があるものとする。

【0032】

この場合には、各パラメータは、

$$\begin{aligned}
 A_1 &= (0.1 [\text{mm}] \times 0.1 [\text{mm}] \times 16 [\text{個}]) / 1 [\text{cm}] \\
 &= 1.6 \times 10^{-3} [\text{m}^2/\text{m}^2\text{床}]
 \end{aligned}$$

$$A_{15} = (0.1 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]} \times 4 \text{ [面]} \times 16 \text{ [個]}) / 1 \text{ [cm]} \\ = 0.192 \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床}]$$

$$A_5 = 1 - A_1 \\ = 1 - 1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床}]$$

$$A_{a5} = A_5 + A_{15} \\ = 1.19 \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床}]$$

と求めることができる。ここで、 A_5 は $1 \text{ [m}^2]$ 中のカーペット繊維が室内空気と接する面積のことである。

【0033】

次に、上記1次条件を用いて2次条件を計算で求める(S2)。この2次条件には、1次条件のみで求まり、時間的に変化しない一義的要因条件(表6参照)と、時間的な変化を伴う経時的変化条件(表7参照)とがある。これらの計算は後で詳細に説明する。

【0034】

【表6】

一義的要因条件	記号
浮遊粒子の蒸発定数	α
製品中の化合物の体積割合	R_a
空気中の化合物の拡散係数	D_{ca}
空間部分の薬剤の蒸発定数	R_d
Fugacity capacity	
○ f 浮遊粒子	Z_i (i=2, 3)
空気	Z_4
床・壁・天井	Z_j (j=5, 6, 7)
分解定数	
○ f カーペットの空間部分	K_1
浮遊粒子	K_i (i=2, 3)
空気	K_4
床・壁・天井	K_j (j=5, 6, 7)

【0035】

【表7】

経時的变化条件	記号
浮遊粒子の直径	d_i ($i=2, 3$)
落下速度	v_i ($i=2, 3$)
浮遊数	n_i ($i=2, 3$)
化合物の移動係数	
空間部分の薬剤と空気	D_{14}
空間部分の薬剤とカーペット繊維	D_{15}
浮遊粒子と空気	D_{i4} ($i=2, 3$)
床・壁・天井と空気	D_{4j} ($j=5, 6, 7$)
空間部分の薬剤の体積	V_1
浮遊粒子の体積	V_i ($i=2, 3$)
床・壁・天井の体積	V_j ($j=5, 6, 7$)
空間部分の薬剤のFugacity capacity	Z_1

【0036】

上記2次条件を用いて7種のFugacityを計算する(S3)。即ち、カーペットの空間部分、大・小の2種の浮遊粒子、室内空気、床(カーペット繊維)、壁、及び天井に関する7種の微分方程式を連立し、これをルンゲクッタジル法で解き、7種のFugacityを経時的に算出する。ここで、微分方程式を解くときに設定される予測刻み時間幅(微小時間単位)は、化合物のマスバランスの変動に合わせて自動的に可変して設定されるようになっている。

【0037】

S4で、上記算出された小粒子のFugacity(必要に応じて大粒子のFugacityも考慮する)及び室内空気のFugacityを用いて化合物の経時的室内空气中濃度を、カーペット繊維及びカーペットの空間部分のFugacityを用いて化合物の床残留量

を各々算出する。

【0038】

S 5 で、薬剤を吸入した場合における安全性評価を行うか否かを判断し、吸入における安全性評価を行う場合には、上記経時的室内空气中濃度を用いて、汚染された空気を吸入することによって、どの程度曝露されるかを示す吸入推定曝露量を計算する (S 6)。その後、吸入推定曝露量に基づいて吸入安全係数を算出する (S 7)。S 8 で、国毎に定められた基準値と上記吸入安全係数とを比較し、基準値に対して吸入安全係数が上回れば「安全性に問題なし」との判断を下す。一方、S 8 で基準値に対して吸入安全係数が下回れば、「安全性に問題あり」との判断を下し、S 1 へ戻って例えば、化合物の変更、製剤処方の変更、あるいは使用条件の変更等の1次条件の変更を検討する。

【0039】

また、上記 S 5 で吸入における安全性評価でない場合には、薬剤が付着した床に接触することによって皮膚がどの程度曝露されるかを示す経皮推定曝露量を計算する (S 9)。その後、S 10 で経皮における安全性評価を行うか否かを判断し、経皮における安全性評価を行う場合には、上記経皮推定曝露量に基づいて経皮安全係数を算出する (S 11)。S 12 で、吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経皮安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S 12 で安全性に問題がある場合には S 1 に戻って 1 次条件の変更を検討する。

【0040】

また、上記 S 10 で経皮における安全性評価でない場合には、S 13 で上記経皮推定曝露量に基づいて、手等に付着した薬剤が口から入ることによってどの程度曝露されるかを示す経口推定曝露量を計算し (S 13)、続いて、この経口推定曝露量に基づいて経口安全係数を算出する (S 14)。この経口曝露は、特に幼児が薬剤の付着した手を口に入れることによって起こる可能性がある。S 15 で吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経口安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S 15 で安全性に問題がある場合には S 1 に戻って 1 次条件の変更を検討する。

【0041】

最後に、S8、S12、あるいはS15において、安全であると判断された場合には総合的な安全性の評価を行う。ここでは、先に求められた吸入安全係数、経皮安全係数、及び経口安全係数の各々の逆数の和を求めて、得られた値を逆数にすることにより、総合安全係数を求める（S16）。この総合安全係数を基準値と比較することによって、先の安全性評価と同様の評価を行う（S17）。

【0042】

次に、上記S2～S4、S6、S7、S9、S11、S13、及びS14の工程について詳細に説明する。

【0043】

(1) 2次条件計算（S2）

上記表6に示した一義的要因条件、及び表7に示した経時的変化条件の計算を説明する。

【0044】

浮遊粒子の蒸発定数（ α ）は、粒子の表面温度（ T_d ）、粒子構成溶媒の性質（蒸気圧 P_d 、分子量 M_d 、比重 ρ_d ）、及び室内環境（空気拡散係数 D_{air} 、蒸気圧 P_∞ 、室温 T ）より、以下のように定義される。

【0045】

【数1】

$$\alpha = \frac{4D_{air}M_d}{R\rho_d} \left(\frac{P_d}{T_d} - \frac{P_\infty}{T_\infty} \right) \dots (1)$$

【0046】

但し、Rは気体定数であり、 P_d ($= 2.26 \times 10^3$ [Pa])、 M_d ($= 18$ [g/mole])、並びに ρ_d ($= 1 \times 10^6$ [g/m³]) はここでは水の性質による値とする。また、この場合には T_∞ (粒子から遠く離れた箇所の温度) は室温 (T) とし、 T_d は室内の温球温度 ($= 292.5$ [K]) とし、 P_∞ (粒子から遠く離れた箇所の水の蒸気圧) は 1.89×10^3 [Pa] とする。尚、上記数値は、室温 (T) が 29.8 [K]、相対湿度が 60 [%RH] のときの値である。

【0047】

尚、 T_d は室温 (T) 及び絶対湿度 (H) に基づき、化学機械の理論と計算 (第2版) (亀井三郎編、産業図書) 等に記載される「質量基準湿度表」から求めることができる。また、 P_d と P_∞ は、以下の式より算出可能である。

【0048】

$$10 \log_{10} P_d = 10.23 - 1750 / (T_d - 38)$$

$$10 \log_{10} P_\infty = 8.23 - 1750 / (T - 38) + 10 \log_{10} \phi$$

ここで、 ϕ は室内の相対湿度である。

【0049】

カーペットの空間部分に入り込んだ薬剤の蒸発定数 (R_d) は、空間部分の断面積 (A_1) 、室温 (T) 、及び湿度 (H) より、

【0050】

【数2】

$$R_d = A_1 h (H_m - H) / C_H \quad \cdots (2)$$

$$C_H = 0.24 + 0.46H$$

$$h = 3.06 \times 10^{-4} (T - T_d)^{1/3}$$

【0051】

と表される。ここで、 H_m は温度 (T_d) での湿度である。カーペットの空間部分に入り込んだ薬剤は、蒸発によってその体積が減少し、最後には化合物を残して消えてしまう。そして、残った化合物がカーペット繊維にしみ込むことになる。

【0052】

大・小の浮遊粒子のFugacity capacity (Z_i , $i=2,3$) は、粒子表面の温度 (T_d) 、及び化合物の蒸気圧 (P_L^s) より、

【0053】

【数3】

$$Z_i = \frac{6 \times 10^6}{P_L^s R T_d} \cdots (3)$$

$$P_L^s = P^s \exp \left\{ 6.79 \left(\frac{T_M}{T_d} - 1 \right) \right\}$$

【0054】

と表される。ここでは、液体状態の化合物の蒸気圧 (P_L^s) を化合物の融点 (T_M) と T_d を用いて算出しているが、 T_M が得られない場合、 P_L^s は固体状態の化合物の蒸気圧 (P^s) と同じとしてよい。

【0055】

空気のFugacity capacity (Z_4) は、室温 (T) より、次のように表される

【0056】

【数4】

$$Z_4 = \frac{1}{R T} \cdots (4)$$

【0057】

床、壁、及び天井のFugacity capacity (Z_j , $j=5,6,7$) は、床・壁・天井を覆うカーペット繊維や壁紙がポリマーで形成されているので、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、及びオクタノール／水分配係数 (K_{ow}) より、

【0058】

【数5】

$$Z_j = K_{ow} C^s / P^s \cdots (5)$$

【0059】

と表され、カーペット繊維中及び壁紙中のオイル成分の含有率0.04や0.3をそれぞれ乗じて Z_j を算出する。

【0060】

カーペットの空間部分、浮遊粒子、空気、及び床・壁・天井の分解定数 (K_1)、(K_i , $i=2,3$)、(K_4)、(K_j , $j=5,6,7$) は、各々の光・酸化半減期 (τ_1)、(τ_i)、(τ_4)、(τ_j) を用いて、次のように示される。

【0061】

【数6】

$$\left. \begin{array}{l} K_1 = 0.693/\tau_1 \\ K_i = 0.693/\tau_i \\ K_4 = 0.693/\tau_4 \\ K_j = 0.693/\tau_j \end{array} \right\} \cdots (6)$$

【0062】

7つの媒体中では主に光分解・酸化反応が起こり、このときの反応速度量は分解定数と体積とFugacity capacityとの積で表される。ここで、式(6)に示すような分解定数の内、空気中の化合物の分解定数 (K_4) は、実測が難しく、この値を決定するのは容易でないことが多い。そこで、実測値が入手できない場合、化合物の構造式を用いて、Atmospheric Oxidation program (Atkinson et al., 1984, Chem. Rev. Vol.84, pp437-470) で算出し求める方法もある。また、粒子中並びに内装材(床・壁・天井)中の分解定数については、実測値が入手できない場合、居住者の安全性を見込みゼロとすることも可能である。

【0063】

時間 t での浮遊粒子の直径 (d_i , $i=2,3$) は、粒子の体積が蒸発により時間と共に小さくなるので、式(1)より求まる蒸発定数 (α)、及び噴霧直後 ($t=0$) の浮遊粒子の直径 (d_{0i}) を用いて、

【0064】

【数7】

$$d_i = \sqrt{d_{0i}^2 - 2\alpha t} \quad \cdots \cdots (7)$$

$$d_i = \sqrt[3]{R_a} d_{0i} \quad \cdots \cdots (7')$$

【0065】

として求められる。

【0066】

一方、この直径 (d_i) は、浮遊粒子中の粒子構成溶媒がすべて蒸発すると、化合物のみの直径となり、一定となる。即ち、粒子構成溶媒がすべて蒸発した後の粒子の直径 (d_i) は、製品中の化合物の体積割合 (R_a) と噴霧直後の粒子の直径 (d_{0i}) とを用いて、上記の式 (7') の通りとなる。

【0067】

製品中の化合物の体積割合 (R_a) は、化合物含有量 (C_a) 及び化合物の比重 (ρ) より、 C_a / ρ として表される。

【0068】

図4に示すように、薬剤の噴霧直後には、床からある高さに、幅 (W_4) 、長さ (L_4) 、及び空間幅 ($H_{(i)}$) の粒子領域 (DZ_i) が形成される。粒子領域 (DZ_i) は浮遊粒子の落下速度 (v_i) にしたがって床に近づき、粒子領域 (DZ_i) の底が床に到達すると、浮遊粒子中の化合物はカーペットの空間部分及びカーペット繊維に移動する。

【0069】

浮遊粒子の落下速度 (v_i , $i=2,3$) は、粒子の動きが重力と空気抵抗に支配されているので、式 (7) より求まる浮遊粒子の直径 (d_i) を用いて、ストークスの法則より、以下の式 (8) となる。

【0070】

【数8】

$$v_i = \frac{\rho g S_c}{18\eta} d_i^2 = \beta (d_{0i}^2 - 2\alpha t) \dots (8)$$

$$S_c = 1 + \frac{2}{7.6 \times 10^7 d_i} [6.32 + 2.01 \exp(-8.322 \times 10^6 d_i)] \dots (8')$$

$$v_i = (\rho / \rho_d) \beta d_i^2 \dots (8'')$$

【0071】

但し、 g は重力加速度、 η は空気の粘性率、 S_c はすべり補正係数、及び β は速度係数である。ここで、すべり補正係数 (S_c) は、粒子が小さくなるとストークスの法則に従わなくなるので、これを補正するための係数であり、式 (7) より求まる粒子の直径 (d_i) により上記の式 (8') で示される。

【0072】

一方、粒子構成溶媒成分がすべて蒸発した後の粒子の落下速度 (v_i) は、化合物の比重 (ρ)、粒子構成溶媒の比重 (ρ_d)、速度係数 (β)、及び式 (7') より求まる粒子の直径 (d_i) により上記に示す式 (8'') と表される。

【0073】

浮遊粒子の数 (n_i , $i=2,3$) は、窓等からの空気の入れ換えによって減少する。このとき、小粒子は室内空気の流れにしたがって漂い、大粒子もその体積が減少して直径が小さくなるので、室内空気の流れにしたがうものと仮定すると、粒子領域 (DZ_i , $i=2,3$) が床に達するまでの間は、粒子の数 (n_i) は部屋の換気のみで減少することになる。従って、粒子の数 (n_i) は、部屋の大きさ ($V_4 = L_4 \times W_4 \times H_4$)、換気率 (G)、粒子の空間幅 ($H_{(i)}$, $i=2,3$)、式 (8) あるいは (8'') より求まる粒子の落下速度 (v_i) より、以下のように表される。但し、 k_4 ($= G V_4 / A_4$) は空気中の化合物の移動速度である。

【0074】

【数9】

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{n_i}{H_{(i)}} v_i - \frac{n_i}{L_4} k_4 \dots (9)$$

【0075】

空間部分の薬剤と空気との間の化合物の移動係数 (D_{14}) は、床の寸法 ($L_4 \times W_4$) 、換気率 (G) 、空間部分の断面積 (A_1) 、後述の式 (16) で求められる空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_1) 、及び式 (4) で求められる空気のFugacity capacity (Z_4) より、次のように示される。但し、 k_1 ($= k_4 / 100$) は、空間部分における薬剤の水面上の化合物の移動速度である。

【0076】

【数10】

$$D_{14} = \frac{1}{1/(k_1 A_1 L_4 W_4 Z_1) + 1/(k_4 A_1 L_4 W_4 Z_4)} \dots (10)$$

【0077】

空間部分の薬剤とカーペット繊維との間の化合物の移動係数 (D_{15}) は、拡散係数 (D_p) 、床の寸法 ($L_4 \times W_4$) 、換気率 (G) 、空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_1) 、及び式 (5) より求まる床のFugacity capacity (Z_5) より、

【0078】

【数11】

$$D_{15} = \frac{1}{1/(k_1 A_{15} L_4 W_4 Z_1) + 1/(k_5 A_{15} L_4 W_4 Z_5)} \dots (11)$$

【0079】

と表される。但し、 k_5 ($= (D_p / t)^{0.5}$) はカーペット繊維内での化合物の移動速度であり、 A_{15} は床に対するカーペット繊維と空間部分の接触面積比であ

る。

【0080】

床・壁・天井中の化合物の拡散係数 (D_p) は、空気中の化合物の拡散係数 (D_{ca}) に 10^{-9} を乗じて求めることが可能であり、 D_{ca} は化合物の性質 (構造式、分子量等) から例えば、Wike and Lee Method (Handbook of Chemical Property Estimation Methods, McGraw-Hill Book Company, 1982) に従って、算出可能である。

【0081】

浮遊粒子と空気との間の化合物の移動係数 (D_{i4}) は、式 (7) あるいは (7') で求まる粒子の直径 (d_i)、空気中の化合物の移動速度 (k_4)、式 (8) または (8') で求まる落下速度 (v_i)、式 (3) (4) で求まるFugacity capacity (Z_i)、及び (Z_4) より、

【0082】

【数12】

$$D_{i4} = \frac{1}{1/(k_i A_i Z_i) + 1/((k_4 + v_i) A_i Z_4)} \dots (12)$$

【0083】

となる。ここで、 A_i ($= \pi d_i^2$) は浮遊粒子の表面積であり、 k_i ($= k_4 / 100$) は粒子表面における化合物の移動速度である。

【0084】

空気と、床・壁・天井と間の化合物の移動係数 (D_{4j}) は、床・壁・天井中の拡散係数 (D_p)、部屋の大きさ ($L_4 \times W_4 \times H_4$)、換気率 (G)、式 (4) (5) で求まるFugacity capacity (Z_4)、及び (Z_j) より、

【0085】

【数13】

$$D_{4j} = \frac{1}{1/(k_4 A_j Z_4) + 1/(k_j A_j Z_j)} \dots (13)$$

【0086】

となる。但し、 A_j は壁及び天井の表面積であり、 k_j ($= (D_p / t)^{0.5}$) は床・壁・天井中の化合物の移動速度である。

【0087】

空間部分の薬剤の体積 (V_1) は、床の寸法 ($L_4 \times W_4$) 、噴霧割合、製品中に含まれる溶剤 (Xylene) の含有率 (C_{sd}) 、製品の希釈倍率 (X_{sol}) 、及び式 (2) で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d) より求まる。この空間部分の体積 (V_1) は、薬剤中の粒子構成溶媒が完全に蒸発するまで減少する。

【0088】

浮遊粒子はそのほとんどが水分 (粒子構成溶媒) であるため、時間の経過と共に、その体積は小さくなる。そして、粒子構成溶媒が完全に蒸発するまで浮遊粒子の体積は減少するので、浮遊粒子の体積変化 (dV_i / dt) は、式 (7) あるいは (7') より求まる浮遊粒子の直径 (d_i) 、及び上記蒸発定数 (α) を用いて、次のように表される。

【0089】

【数14】

$$\frac{dV_i}{dt} = -\frac{\pi}{2} \alpha d_i \quad \dots \quad (14)$$

【0090】

床・壁・天井の体積 (V_j) は、薬剤が噴霧される前の床・壁・天井を薄い膜状のものと考え、薬剤がそれらの膜にしみ込むにつれてその厚みが増して体積が増加するものと考えると、床・壁・天井中の化合物の拡散係数 (D_p) より、以下のようになる。

【0091】

【数15】

$$V_j = 2(D_p t)^{0.5} A_j \quad \dots \quad (15)$$

【0092】

空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_1) は、最初は上記床・壁・天井のFugacity capacity と同様に、 $K_{ow}C^s / P^s$ で表されるが、薬剤が蒸発し始めると、Fugacity capacity (Z_1) は徐々に C^s / P^s (水のFugacity capacity) に近づく。従って、Fugacity capacity (Z_1) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール/水分配係数 (K_{ow})、及び製品の性質変化定数 (a) より、次のように示される。

【0093】

【数16】

$$Z_1 = (e^{-at} K_{ow} + 1 - e^{-at}) C^s / P^s$$

【0094】

ここで、製品の性質変化定数 (a) は、式 (2) で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d)、製品中に含まれる溶剤 (Xylene) の含有率 (C_{sd})、及び製品の希釈倍率 (X_{sol}) に基づき算出することができる。即ち、空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_1) は、

$$Z_1 = \{ (\text{(希釈液中の有機溶剤の比率)} K_{ow} + \text{(希釈液中の水の比率)}) \times C^s / P^s$$

とも表され、この式と前記式 (16) とを連立することにより、製品の性質変化定数 (a) が算出される。

【0095】

(2) Fugacity計算 (S3)

カーペットの空間部分の薬剤の振る舞いは、Fugacity (f_1) に関する微分方程式として、

【0096】

【数17】

$$\frac{df_1}{dt} V_1 Z_1 = \sum_{i=2}^3 n_i v_i A_1 V_i Z_i f_i / H_{(i)} \quad \text{Deposition(i)}$$

F-change

$$+ R_d L_4 W_4 Z_1 f_1 \quad \text{V-change}$$

$$- \sum_{k=4}^5 D_{1k} (f_1 - f_k) \quad \text{Transference(4,5)}$$

$$- K_1 V_1 Z_1 f_1 \quad \text{Degradation}$$

••• (17) •••

【0097】

と表される。ここで、Deposition(i) の項は浮遊粒子の空間部分への落下に伴う付着を、V-changeの項は空間部分の薬剤の体積変化（時間と共に減少）を、Transference(4,5) の項は空間部分と空気及び床（カーペット纖維）との間の化合物の移動量を、Degradation の項は空間部分での化合物の分解量を各々表している。尚、Fugacity (f_1) は空間部分の薬剤が完全に蒸発するまで有効である。

【0098】

大・小の浮遊粒子中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_i , $i=2,3$) に関する微分方程式として、

【0099】

【数18】

$$\frac{df_i}{dt} V_i Z_i = \frac{\pi}{2} \alpha d_i Z_i f_i \quad V\text{-change}$$

$$F\text{-change} \quad -D_{i4} (f_i - f_4) \quad \text{Transference (4)}$$

$$-K_i V_i Z_i f_i \quad \text{Degradation}$$

... (18)

【0100】

と表される。ここで、V-changeの項は浮遊粒子の体積変化（時間と共に減少）を、Transference(4) の項は粒子と空気との間の化合物の移動量を、Degradation の項は粒子中の化合物の分解量を各々表している。尚、時間の経過と共にカーペットの空間部分や床（カーペット繊維）に粒子が吸収されて、Fugacity (f_i) は失われる。

【0101】

室内空气中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_4) に関する微分方程式として、

【0102】

【数19】

$$\begin{aligned}
 \frac{df_4}{dt} V_4 Z_4 &= -G V_4 Z_4 f_4 && \text{Ventilation} \\
 \text{F-change} & -D_{14}(f_4 - f_1) && \text{Transference (1)} \\
 -\sum_{i=2}^3 n_i D_{14}(f_4 - f_i) & && \text{Transference (i)} \\
 -\sum_{j=5}^7 D_{4j}(f_4 - f_j) & && \text{Transference (j)} \\
 -K_4 V_4 Z_4 f_4 & && \text{Degradation}
 \end{aligned}$$

..(19)

【0103】

と表される。ここで、Ventilation の項は化合物の室内からの排出量を、Transference(1) の項は空気と空間部分との間の化合物の移動量を、Transference(i) の項は空気と浮遊粒子との間の化合物の移動量を、Transference(j) の項は空気と床・壁・天井との間の化合物の移動量を、Degradation の項は空气中での化合物の分解量をそれぞれ示している。

【0104】

床（カーペット繊維）中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_5) に関する微分方程式として、

【0105】

【数20】

$$\frac{df_5}{dt} V_5 Z_5 = \sum_{i=2}^3 n_i v_i A_{a5} V_i Z_i f_i / H_{(i)} \quad \text{Deposition(i)}$$

F-change

$$- \sqrt{D_p / t} A_{a5} Z_5 f_5 \quad \text{V-change}$$

$$- D_{15} (f_5 - f_1) \quad \text{Transference (1)}$$

$$- D_{45} (f_5 - f_4) \quad \text{Transference (4)}$$

$$- K_5 V_5 Z_5 f_5 \quad \text{Degradation}$$

... (20)

【0106】

と表される。ここで、Deposition(i) の項は浮遊粒子のカーペット纖維への落下に伴う付着を、V-changeの項は床の体積変化（時間と共に増加）を、Transference(1) の項はカーペット纖維と空間部分との間の化合物の移動量を、Transference(4) の項はカーペット纖維と空気との間の化合物の移動量を、Degradation の項はカーペット纖維中での化合物の分解量をそれぞれ示している。

【0107】

壁及び天井中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_j , $j=6,7$) に関する微分方程式として、

【0108】

【数21】

$$\frac{df_j}{dt} V_j Z_j = \sqrt{D_p/t} A_j Z_j f_j \quad V\text{-change}$$

F-change

$$- D_{4j}(f_j - f_4) \quad \text{Transference(4)}$$

$$- K_j V_j Z_j f_j \quad \text{Degradation}$$

...(21)

【0109】

と表される。ここで、V-changeの項は壁・天井の体積変化（時間と共に増加）を、Transference(4)の項は壁・天井と空気との間の化合物の移動量を、Degradationの項は壁・天井中の化合物の分解量を各々示している。

【0110】

上記式(17)ないし(21)の7種の微分方程式を連立してルンゲクッタジル法にて解くことにより、Fugacity($f_1 \sim f_7$)を算出する。

【0111】

この連立微分方程式を解くときに、予測刻み時間幅(dt)を設定する必要がある。つまり、予測刻み時間幅は、まず時間(t_0)での連立微分方程式の解を求め、次に予測刻み時間幅を加えた($t_0 + dt$)時間での微分方程式の解を求ることであり、予測刻み時間幅を次々と加えながら解を得ることによって経時的に変化するFugacityが求められる。理論的には、上記予測刻み時間幅の設定時間が小さければ小さいほど正確な解を得ることができるが、計算時間が非常に長くなる。逆に、設定時間が大き過ぎると解が発散して、解に誤りが生じ易くなる。

【0112】

そこで、本願発明では、非常に大きな変化が薬剤に起こるときには予測刻み時間幅が小さく設定されるように、逆に大きな変化がない場合には予測刻み時間幅

が大きく設定されるようにしている。

【0113】

具体的には、薬剤の投入量と得られた解とが合致するように常にマスバランスを確認し、マスバランスが大きく変動しない場合には予測刻み時間幅を大きく、マスバランスが変動し始める場合には予測刻み時間幅を小さくする。例えば、マスバランスの変動を土5%の精度に設定すると、

化合物投入量 / (存在量 + 分解量 + 排出量) = 0.95 ~ 1.05
の関係が常に満たされるように、即ちマスバランスの変動が土5%の範囲内に納まるように予測刻み時間幅を絶えず設定する。

【0114】

ここで、上記化合物投入量は、床の寸法 ($L_4 \times W_4$)、化合物含有量 (C_a)、及び噴霧割合より求められる。また、存在量は、連立微分方程式で7種の媒体中の経時的な化合物量が求められるので、それらを合計して以下のように算出する。分解量及び排出量も以下に示す通りである。

【0115】

【数22】

$$\text{存在量} = V_1 Z_1 f_1 + \sum_{i=2}^3 n_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 f_k V_k Z_k$$

$$\text{分解量} = K_1 V_1 Z_1 f_1 + \sum_{i=2}^3 K_i n_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 K_k f_k V_k Z_k$$

$$\text{排出量} = G V_4 Z_4 f_4 + \sum_{i=2}^3 G n_i V_i Z_i f_i$$

【0116】

図7のフローチャートに基づいて、この予測刻み時間幅 (dt) の設定方法を

説明する。

【0117】

まず、予測刻み時間幅 (dt) の初期値を入力し (S21)、次にマスバランスの差の上限である上限設定値 (例えば 0.1 [%])、及びマスバランスの差の下限である下限設定値 (例えば 10^{-6} [%]) を入力する (S22)。その後、 $t = t_0$ のFugacity及びマスバランスを計算し (S23・S24)、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のFugacity及びマスバランスを計算する (S25・S26)。

【0118】

マスバランスの変動が土 5 %の範囲内であるかどうかを確認し (S27)、マスバランスの変動が土 5 %の範囲内であれば、 $t = t$ (あるいは t_0) のマスバランスと、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のマスバランスとの差が上限設定値以上であるか否かを判断する (S28)。S28で上限設定値以上であれば、予測刻み時間幅 (dt) を小さくした方が解が正確になるので、予測刻み時間幅 (dt) を1/2倍して設定を変更し (S29)、S28で上限設定値より小さければS30で $t = t$ (あるいは t_0) のマスバランスと、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のマスバランスとの差が下限設定値以下であるか否かを判断する。

【0119】

S30でマスバランスの差が下限設定値以下であれば、予測刻み時間幅 (dt) を大きくしても解には影響を及ぼさないので、予測刻み時間幅 (dt) を2倍して設定を変更し (S31)、次に、S31で変更した予測刻み時間幅 (dt) が予測刻み時間幅 (dt) の最大値 (例えば、0.1 [hour]) 以下であるか否かを判断する (S32)。S32で予測刻み時間幅 (dt) が最大値以下の場合には、解は発散しないので、S31で設定した予測刻み時間幅 (dt) を用いる。一方、S32で予測刻み時間幅 (dt) が最大値より大きい場合には解が発散する可能性があるので、予測刻み時間幅 (dt) を最大値に設定し直す (S33)。また、上記S30において、マスバランスの差が下限設定値よりも大きければ、即ち下限設定値と上限設定値との間にあれば予測刻み時間幅 (dt) は変更

せずに計算を続ける。

【0120】

上記S29、S30、S32、あるいはS33の工程を経ると、S25へ戻つて再び計算を行い、目的の時間に達するまで上記工程を繰り返す。

【0121】

一方、S27において、マスバランスの変動が±5%の範囲を越えると、マスバランスの変動が大きいので、変動が±5%の範囲内の場合と比較して予測刻み時間幅(dt)を小さくして計算を行った方がよい。従って、一旦計算を中止し(S34)、下限設定値を小さく設定し直してから(S35)、S23の工程へ戻る。

【0122】

このように、予測刻み時間幅を一定値にすることなく、マスバランスの変動をチェックしながら予測刻み時間幅を可変設定することにより、正確に、かつ効率よくFugacityを算出することが可能となる。

【0123】

(3) 経時的室内空气中濃度及び床残留量算出(S4)

化合物の経時的室内空气中濃度は、上記(2)項目で求められた小粒子のFugacity(f_3)にFugacity capacity(Z_3)を掛けたものと、室内空気のFugacity(f_4)にFugacity capacity(Z_4)を掛けたものとを足し合わせることによって算出される。尚、薬剤の種類によって大粒子が人体に吸入される場合には、大粒子のFugacity(f_2)も考慮に入れて計算すればよい。

【0124】

化合物の床残留量は、床のFugacity(f_5)にFugacity capacity(Z_5)を掛けることによって算出される。特に、溶媒が水である場合、前記算出値(f_5 , Z_5)と、空間部分のFugacity(f_1)にFugacity capacity(Z_1)を掛けた値とを合計することによって算出することが望ましい。

【0125】

(4) 吸入推定曝露量及び吸入安全係数計算(S6・S7)

前述した経時的室内空气中濃度は、例えば図5(a)に示すような曲線を描く

。この濃度曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積濃度を求め（図5（b）参照）、この値から平均室内空气中濃度を算出する。尚、上記特定期間は目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

【0126】

次に、上記平均室内空气中濃度、呼吸量、及び曝露時間に基づいて、吸入推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{吸入推定曝露量 [mg/kg/day]} = \text{平均室内空气中濃度 [mg/m}^3] \times \\ \text{呼吸量 [m}^3/\text{kg/min}] \times \text{曝露時間 [min/day]}$$

の計算を行う。ここで、上記呼吸量は文献値あるいは実測値を用いればよい。また、大人と子供とに呼吸量を分けて考慮すれば、さらに適切な吸入推定曝露量を得ることができる。

【0127】

吸入安全係数は、予め動物実験により調べられた吸入毒性に関する無影響量と、先に求められた吸入推定曝露量とから算出される。即ち、

吸入安全係数 = 吸入無影響量 [mg/kg/day] / 吸入推定曝露量 [mg/kg/day]
で表される。

【0128】

(5) 経皮推定曝露量及び経皮安全係数計算 (S9・S11)

前述の床残留量は、例えば図6（a）に示すような曲線を描く。この残留量曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積残留量を求め（図6（b）参照）、この値から平均床残留量を算出する。尚、上記特定期間は、目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

【0129】

次に、平均床残留量、皮膚付着率、接触面積、及び体重に基づいて、経皮推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]} = (\text{平均床残留量 [mg/m}^3] \times \\ \text{皮膚付着率 [%]} \times \text{接触面積 [m}^2/\text{day}]) / \text{体重 [kg]}$$

の計算を行う。ここで、上記接触面積は文献値（例えば、4 [m^3/day]）を用いればよい。また、皮膚付着率は化合物の存在する床に皮膚が接触した場合に、化合物が皮膚に付着する割合のことであり、この値は文献値あるいはモデル実験値を用いればよい。

【0130】

上記皮膚付着率のモデル実験方法は、次の通りである。幼児が床に接する圧力と同様の圧力で、デニムの布（8cm×10cm）の上に重し（8cm×8cm×8cm；4.2kg）を載せ、幼児が動くような速さ（120cm/15sec）でデニムの布を床上で引っ張る。このデニムと床を分析することにより、デニム及び床に含有される化合物を算出し、その比から皮膚付着率を求める。尚、この方法で得た皮膚付着率は、実際に手を床に押し付けて、手と床の分析値から求めた皮膚付着率と同等か、あるいは若干高めであることが確認されており、居住者の曝露評価を行う上でこのモデル実験方法は有用であることが確認された。

【0131】

次に、経皮安全係数は、予め動物実験により調べられた経皮毒性に関する無影響量と、先に求められた経皮推定曝露量とから算出される。即ち、

経皮安全係数＝経皮無影響量 [mg/kg/day] / 経皮推定曝露量 [mg/kg/day]
で表される。

【0132】

しかしながら、一般に経皮無影響量はあまり求められておらず、文献値もない。従って、経皮安全係数を、経皮推定曝露量と、文献値が多数存在する経口無影響量及び経皮吸収率を用いて、以下の式に基づいて求める方がより正確な値を求めることができる。

【0133】

経皮安全係数＝経口無影響量 [mg/kg/day] /
(経皮推定曝露量 [mg/kg/day] × 経皮吸収率 [%])

ここで、経皮吸収率が不明の場合には、通常、国別のガイドライン（例えば10%）があり、これを用いればよい。

【0134】

(6) 経口推定曝露量及び経口安全係数計算 (S13・S14)

上記(5)項目で得られた経皮推定曝露量、手表面積比、及び口移行率に基づいて、経口推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{経口推定曝露量} [\text{mg/kg/day}] = \text{経皮推定曝露量} [\text{mg/kg/day}] \times$$

$$\text{手表面積比} [\%] \times \text{口移行率} [\%]$$

の計算を行う。ここで、上記手表面積比は(手表面積/体表面積)で表され、その値は文献値(例えば、5 [%])を用いればよい。また、口移行率は仮定値であり、例えば100%とする。

【0135】

次に、経口安全係数は、予め動物実験により調べられた経口毒性に関する無影響量と、先に求められた経口推定曝露量とから算出される。即ち、

$$\text{経口安全係数} = \text{経口無影響量} [\text{mg/kg/day}] / \text{経口推定曝露量} [\text{mg/kg/day}]$$

で表される。

【0136】

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、上記化合物を含む薬剤を床全域に噴霧したときに、カーペット繊維間の空間部分、大・小の2種の浮遊粒子、室内空気、カーペット繊維全体、壁、及び天井のFugacityに関する微分方程式を連立して解き、その解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測するものである。このとき、予測刻み時間幅は、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定される。

【0137】

従って、連立微分方程式を解くときに、化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように噴霧後の化合物のマスバランスが常にチェックされて予測刻み時間幅が可変するので、マスバランスの変動が小さいときには上記予測刻み時間幅が大きく設定され、マスバランスの変動が大きくなり始めると予測刻み時間幅が小さく設定されることとなる。つまり、経時的変化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に予測刻み時間

幅が設定される。これにより、コンピュータで処理する際に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

【0138】

また、本実施形態における有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、上記予測結果を用いて、薬剤を床全面に噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価するものである。

【0139】

従って、短時間、かつ精度良く、化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となる。これにより、化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

【0140】

尚、本実施形態では、ルンゲクッタジル法を用いてFugacityを求めたが、他の方法を用いて微分方程式を解くこともできる。しかしながら、ルンゲクッタジル法を用いると、上述した微分方程式のプログラムをBasicで容易に組むことができるので望ましい。また、ルンゲクッタジル法以外で微分方程式を解く際にも、前述のように、予測刻み時間幅を設定することにより、同様の効果を得ることが可能である。

【0141】

【発明の効果】

以上のように、本発明の請求項1に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、有害生物防除活性化合物を含む溶液を纖維の穂立ちを有する敷物が置かれた床全域に噴霧するときに、上記纖維の穂立ち間の空間部分、大・小の2種の浮遊粒子、室内空気、纖維全体、壁、及び天井における上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立し、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、連立微分方程式の解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測する方法である。

【0142】

これにより、経時的变化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときには、マスバランスの変動に合わせて自動的に微小時間単位が設定されるので、微小時間単位が一定値であった従来の方法と比べて、コンピュータで上記微分方程式を処理する場合に、短時間で正確な解を得ることが可能となるという効果を奏する。

【0143】

請求項2に記載の有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、請求項1に記載の室内挙動予測方法による予測結果に基づいて、上記溶液を床全域に噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価する方法である。

【0144】

これにより、短時間、かつ精度良く、有害生物防除活性化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となるので、上記化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなるという効果を奏する。

【0145】

尚、請求項3に記載したように、有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法をコンピュータプログラムとして実現することもできる。

【図面の簡単な説明】

【図1】

本発明にかかる有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法を示すフローチャートである。

【図2】

上記化合物の室内挙動予測を行うときのカーペットのモデル化状態を示す説明図である。

【図3】

上記化合物の室内挙動予測を行うときの室内環境のモデル化状態を示す説明図である。

【図4】

粒子領域の落下状態を示す説明図である。

【図5】

(a) は室内空気中濃度の経時的変化を示すグラフであり、(b) は上記グラフを用いて平均室内空気中濃度を求める場合の説明図である。

【図6】

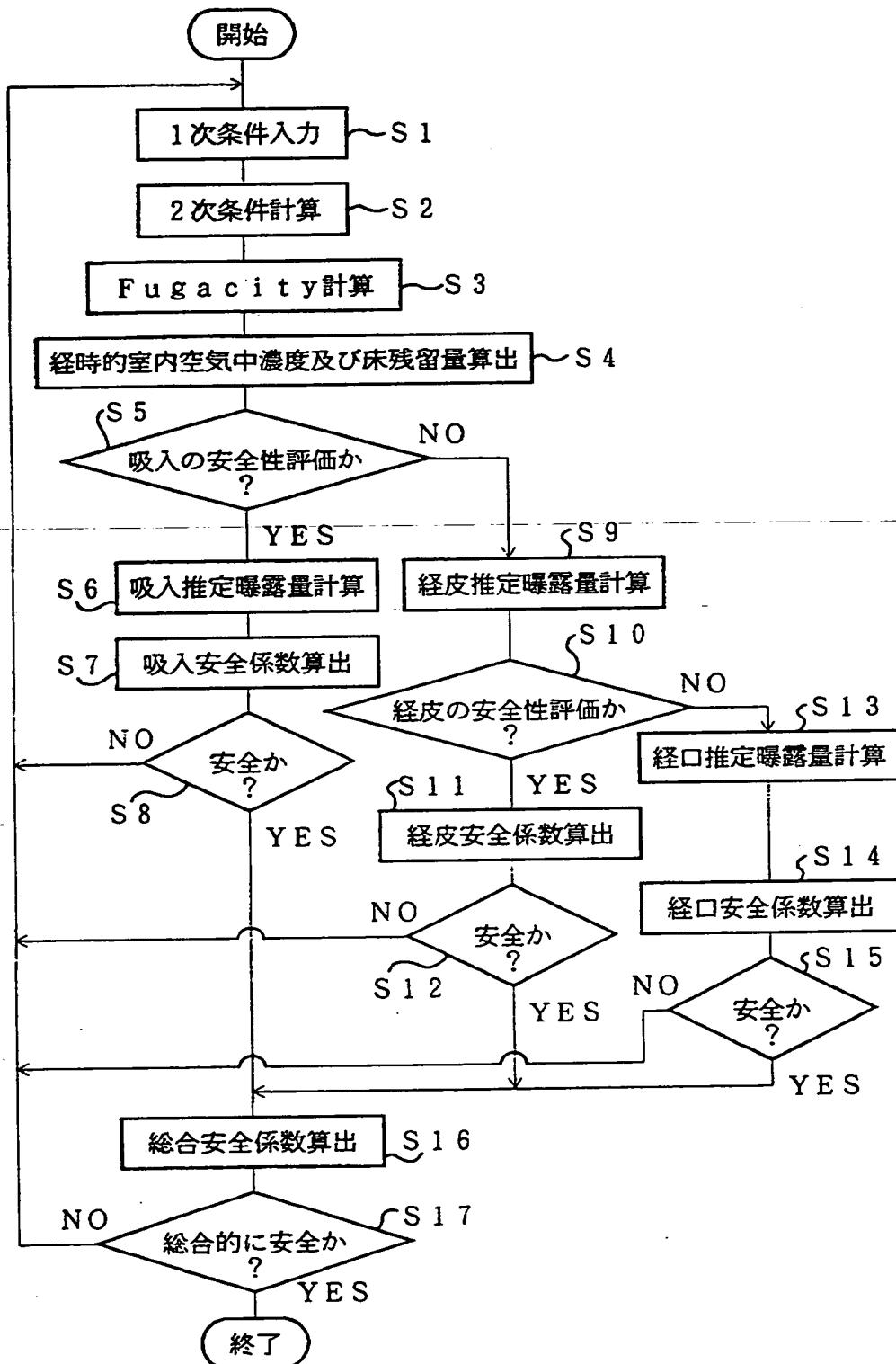
(a) は床残留量の経時的変化を示すグラフであり、(b) は上記グラフを用いて平均床残留量を求める場合の説明図である。

【図7】

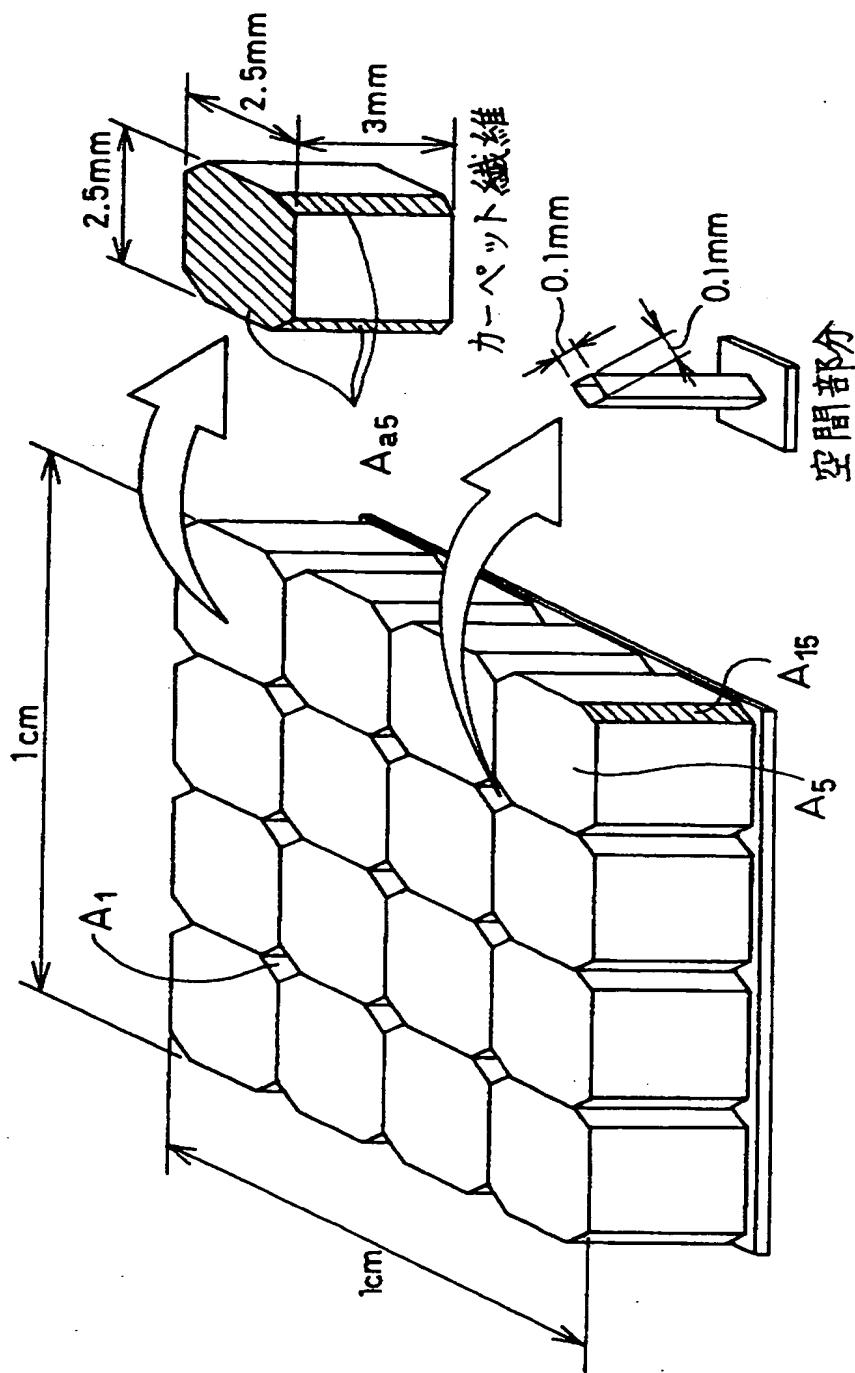
予測刻み時間幅の設定方法を示すフローチャートである。

【書類名】 図面

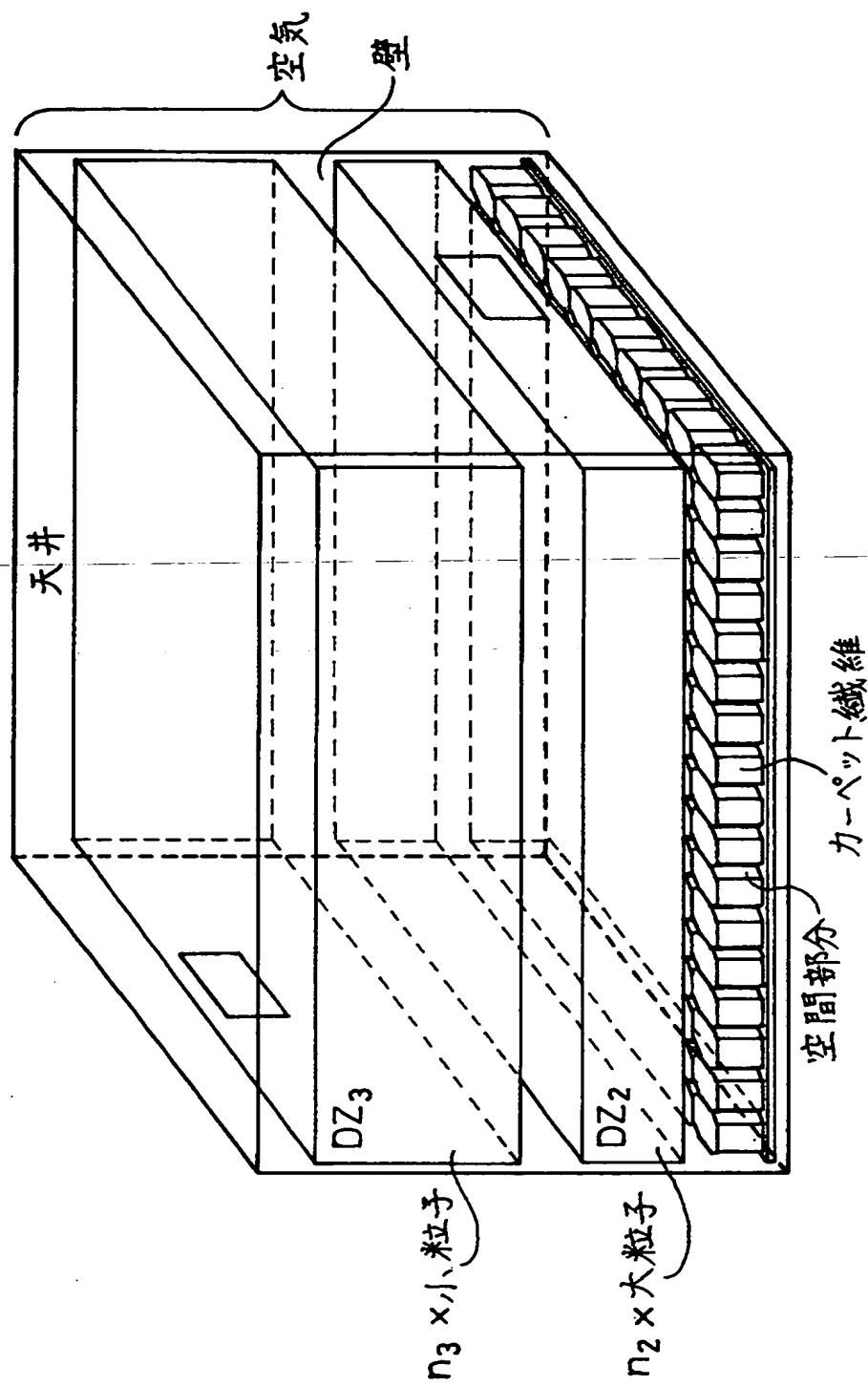
【図1】



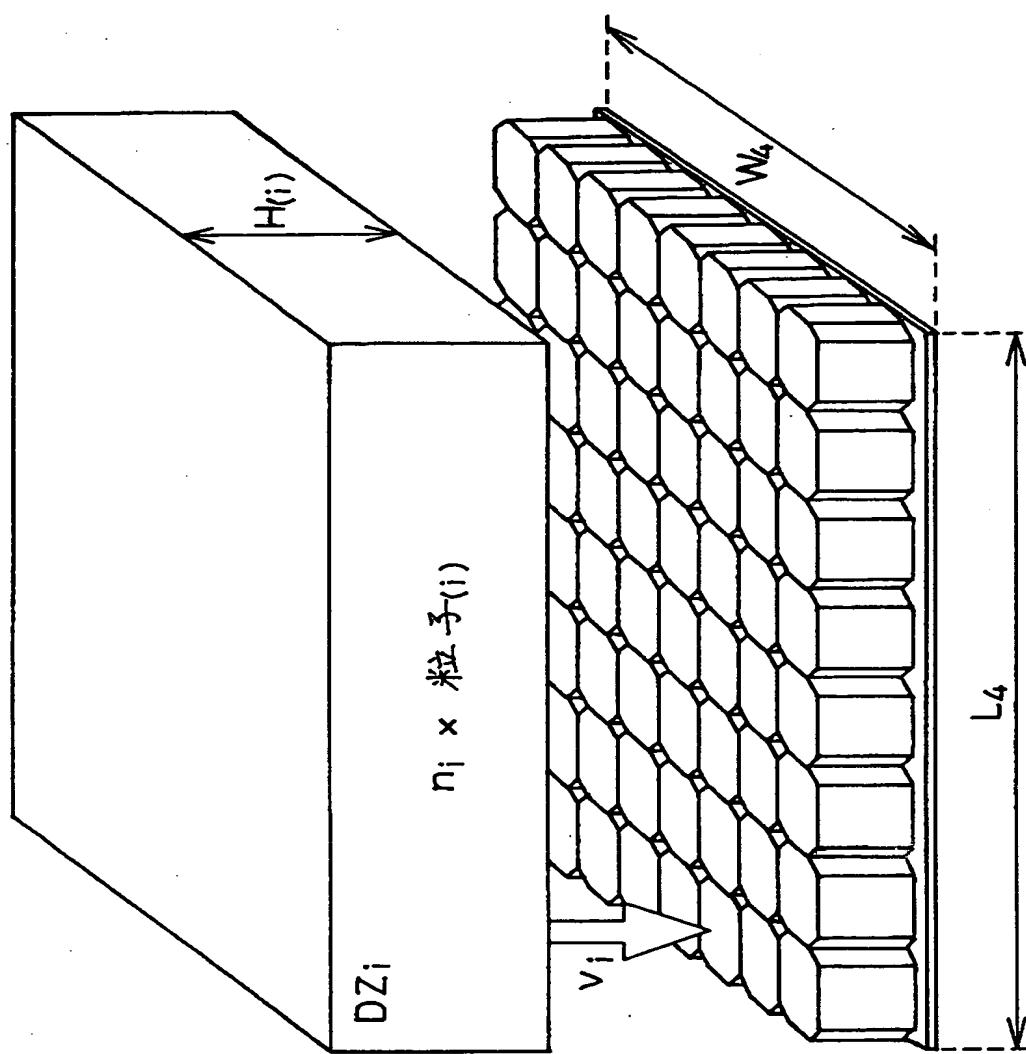
【図2】



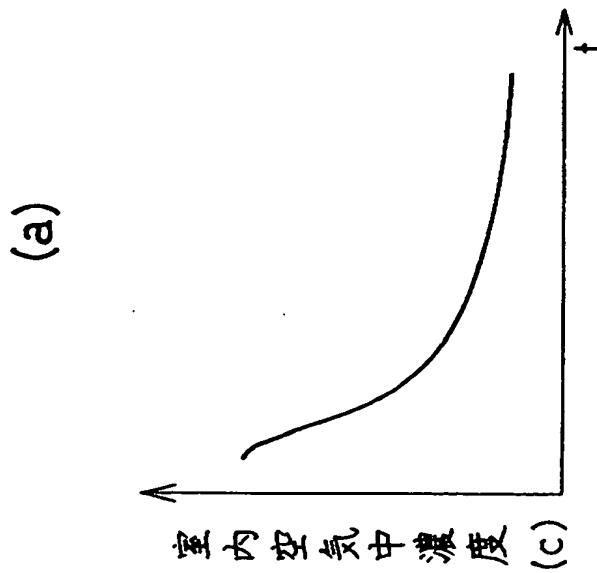
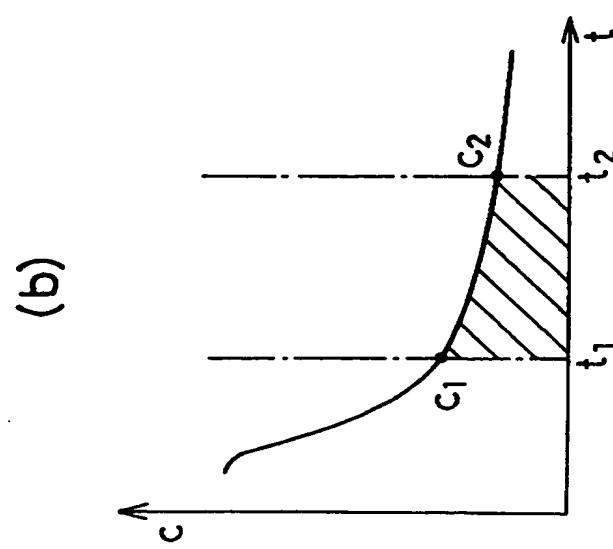
【図3】



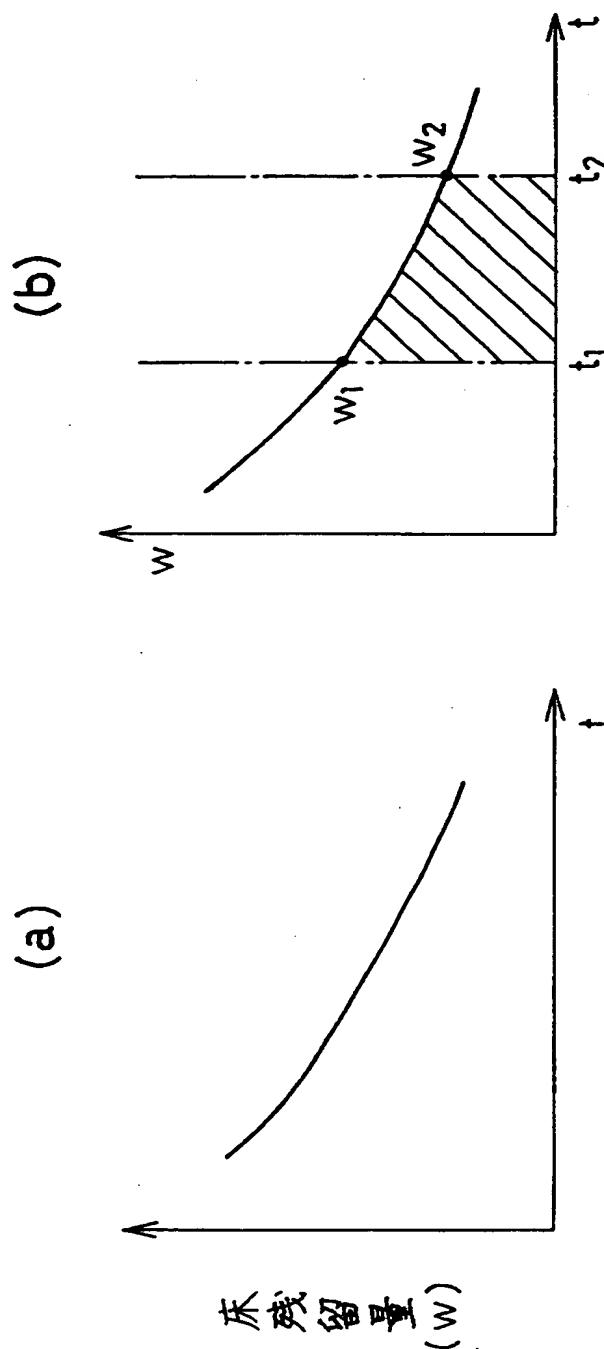
【図4】



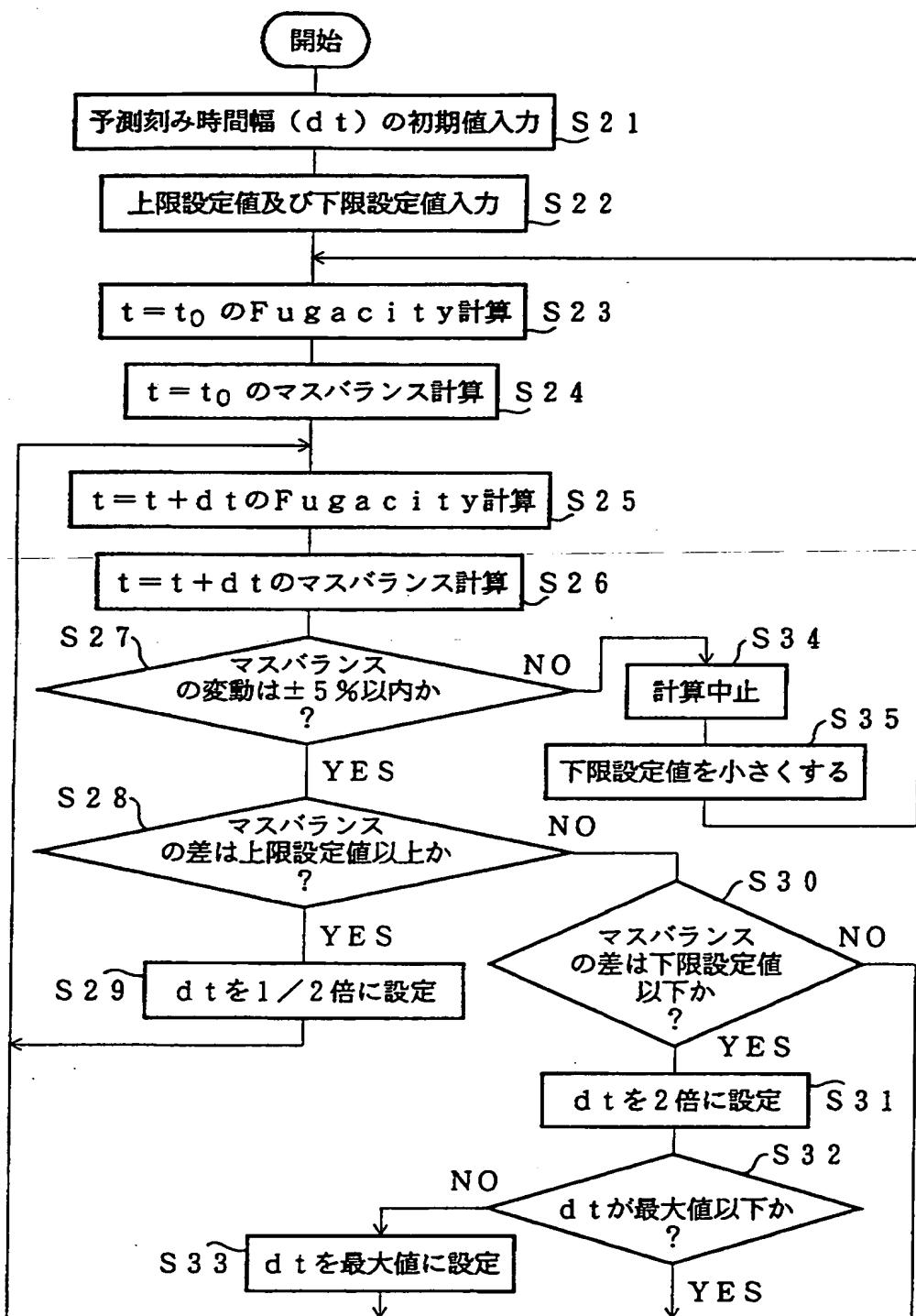
【図5】



【図6】



【図7】



【書類名】 要約書

【要約】

【課題】 有害生物防除活性化合物を含む薬剤をカーペットが敷かれた床全面に噴霧したときの化合物の室内挙動を予測する場合に、予測刻み時間幅を自動的に設定して、連立微分方程式を短時間かつ正確に処理する。

【解決手段】 有害生物防除活性化合物の性質、室内環境、カーペット条件、及び製品の性質等の1次条件を入力し（S1）、それらに基づいてカーペット纖維間の空間部分、大・小の2種の浮遊粒子、室内空気、カーペット纖維、壁、及び天井のFugacityに関する微分方程式を連立する。予測刻み時間幅を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、各Fugacityを計算する（S3）。Fugacityに基づいて、室内空気中濃度や床残留量を算出し、上記化合物の室内挙動を予測する（S4）。

【選択図】 図1

【書類名】 職権訂正データ
【訂正書類】 特許願

〈認定情報・付加情報〉

【特許出願人】

【識別番号】 000002093

【住所又は居所】 大阪府大阪市中央区北浜4丁目5番33号

【氏名又は名称】 住友化学工業株式会社

【代理人】

【識別番号】 100080034

【住所又は居所】 大阪府大阪市北区天神橋2丁目北2番6号 大和南
森町ビル 原謙三國際特許事務所

【氏名又は名称】 原 謙三

出願人履歴情報

識別番号 [000002093]

1. 変更年月日 1990年 8月28日

[変更理由] 新規登録

住 所 大阪府大阪市中央区北浜4丁目5番33号

氏 名 住友化学工業株式会社